

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: یک ۱

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- ذره ای که از معادله مستقل از زمان شرودینگر تبعیت می کند باید داری:

۰۱. تابع ویژه‌های نرمال باشد  
۰۲. انرژی پتانسیلی مستقل از موقعیت باشد  
۰۳. طول موج دوبرویی مستقل از موقعیت باشد  
۰۴. انرژی کلی مستقل از موقعیت باشد

۲- دلیل نرمال بودن تابع موج چیست؟

۰۱. تضمین نمودن آنکه مربع  $\Psi$  باید انتگرال پذیر باشد  
۰۲. برای آنکه  $\Psi^* \Psi$  برابر با تابع توزیع احتمال برای ذره است  
۰۳. برای آنکه  $\Psi$  تابع ویژه اپراتور هامیلتونی باشد  
۰۴. برای آنکه  $\Psi$  از شرایط مرزی مسئله اجابت نماید.

۳- حاصل کدام انتگرال مخالف صفر است؟

۰۱.  $\int_0^\pi \sin \theta \cos \theta d\theta$   
۰۲.  $\int_{-\pi}^\pi \sin \theta \cos \theta d\theta$   
۰۳.  $\int_0^\pi \sin^3 \theta \cos^2 \theta d\theta$   
۰۴.  $\int_0^\pi \sin^2 \theta \cos^3 \theta d\theta$

۴- در حل ذره در جعبه به طول  $L$  با تابع  $A \sin(kx) + B \cos(kx)$  شروع می کنیم. کدام جمله درست است؟

۰۱. مقدار  $k$  با شرط نرمال کردن تابع بدست میاید.  
۰۲. لازم است این تابع در  $x=0$  برابر  $L$  گردد.  
۰۳. شرط مرزی در  $x=0$  استفاده میشود تا نشان داده شود که  $B=0$  است  
۰۴. با اضافه کردن  $C \exp(ikx)$  به تابع این تابع هنوز تابع ویژه اپراتور هامیلتونی است.

۵- برای ذره در جعبه به طول  $L$  و در حالت  $n=3$  احتمال یافتن ذره در دامنه  $0 \leq x \leq L/4$  کدام است؟

۰۱. بیشتر از  $1/4$   
۰۲. برابر  $1/6$   
۰۳. برابر  $1/4$   
۰۴. کمتر از  $1/6$

۶- برای ذره در جعبه مکعبی به طول  $L$  داریم:

۰۱. انرژی نقطه صفر برابر  $3h^2 / 8mL^2$   
۰۲. دانسیته احتمال در مرکز جعبه برای حالت  $\Psi_{211}$  ماکزیمم است  
۰۳. درجه همترازی حالت پایه برابر ۳ است  
۰۴.  $\Psi_{111}$  دارای سه صفحه گره است.

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

۷- کدام جمله با نتایج مکانیک کوانتومی نوسانگر هماهنگ یک بعدی در تضاد است؟

۱. با کاهش جرم نوسانگر انرژی نقطه صفر افزایش می یابد.
۲. فرکانس آن شبیه فرکانس کلاسیکی است.
۳. با افزایش ثابت نیرو فواصل دو تراز انرژی متوالی افزایش می یابد.
۴. انرژی پتانسیل ارتعاشی ثابت حرکت است.

۸- طول موج  $4.33 \times 10^{-6}$  متر نوسانگر هماهنگ را از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته تحریک میکند. اگر تنها ثابت نیرو دو برابر گردد کدام طول موج در این تحریک اتفاق می افتاد؟ (بر حسب متر)

۱.  $4.33 \times 10^{-6}$
۲.  $2.16 \times 10^{-6}$
۳.  $3.06 \times 10^{-6}$
۴.  $6.12 \times 10^{-6}$

۹- انرژی الکترونی  $Li^{2+}$  در حالت  $2s$  کدام است؟

۱. شبیه اتم هیدروژن در حالت  $1s$
۲. نه برابر اتم هیدروژن در حالت  $1s$
۳. یک چهارم اتم هیدروژن در حالت  $1s$
۴. نه چهارم اتم هیدروژن در حالت  $1s$

۱۰- اوربیتال اتمی  $5d_{xy}$  دارای چند گره صفحه ای و چند گره شعاعی است؟

۱. دو گره صفحه ای و یک گره شعاعی
۲. دو گره صفحه ای و سه گره شعاعی
۳. سه گره صفحه ای و یک گره شعاعی
۴. دو گره صفحه ای و دو گره شعاعی

۱۱- برای اتم هیدروژن در حالت  $n=4$  ماکزیمم مولفه  $Z$  ممکن گشتاور زاویه ای اوربیتالی چیست؟

۱.  $2\hbar$
۲.  $3\hbar$
۳.  $\sqrt{12}\hbar$
۴.  $\sqrt{6}\hbar$

۱۲- یک تابع ویژه برای اتم هیدروژن بصورت زیر است:

$$[1/\sqrt{32\pi a_0^3}](r/a_0) \exp(-r/2a_0) \cos\theta$$

کدام جمله در مورد این تابع موج درست است؟

۱. ضریب نرمال کنندگی برابر  $[1/\sqrt{32\pi a_0^3}](r/a_0)$
۲. این تابع در هسته صفر نمیشود
۳. برای این مورد  $l=1$  و  $m_l=0$  است
۴. این حالت توزیع ابر الکترونی کروی  $s$  است.

۱۳- تابع توزیع شعاعی برای حالت  $1s$  مشخص می کند که :

۱. بیشترین مقدار احتمال فاصله از هسته برابر صفر است
۲. متوسط فاصله  $r$  صفر است
۳. متوسط فاصله  $r$  بزرگتر از بیشترین مقدار احتمال است
۴. متوسط فاصله  $r$  برابر با محتملترین مقدار است.

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

۱۴- کدام تابع موج قابل قبول برای حالت پایه اتم هلیوم است؟

۱.  $[1s(1)1s(2)-1s(1)1s(2)]\alpha(1)\alpha(2)$       ۲.  $1s(1)1s(2)[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]$

۳.  $[1s(1)2s(2)+2s(1)1s(2)]\alpha(1)\alpha(2)$       ۴.  $1s(1)2s(2)[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$

۱۵- چند گانگی اسپین در حالت پایه با آرایش  $4s^23d^7$  چیست؟

۱. ۱۹      ۲. ۱۵      ۳. ۴      ۴. ۵

۱۶- تابش تولیدی از منبع لامپ جیوه دارای انرژی  $2/845$  الکترون ولت است. طول موج این تابش بر حسب نانو متر چیست؟

ثابت پلانک:  $6.63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$       بار الکترون:  $1.6 \times 10^{-19}$  کولن      سرعت نور:  $3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$

۱. ۵۷۹      ۲. ۳۵۵      ۳.  $404/7$       ۴.  $436/9$

۱۷- طول موج دوبروی الکترون با انرژی جنبشی ۱ الکترون ولت چیست؟ ثابت پلانک برابر  $6.63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

۱.  $1/23$  میکرو متر      ۲.  $28/7$  پیکو متر      ۳.  $364$  نانو متر      ۴.  $8/70$  آنگستروم

۱۸- انرژی نقطه صفر مکانیک کوانتومی الکترونی محبوس شده در جعبه یک بعدی به طول یک نانو متر چیست؟ (بر حسب ژول)

۱.  $2.4 \times 10^{-19}$       ۲. صفر      ۳.  $6.0 \times 10^{-20}$       ۴.  $5.4 \times 10^{-19}$

۱۹- ماکزیمم طول موج تحریک الکترون در سیستم مزدوج او-۳ بوتادی ان بر اساس مدل ذره در جعبه یک بعدی برابر  $210$  نانو متر است. طول موثر زنجیر این سیستم چیست؟ (بر حسب آنگستروم)

جرم الکترون:  $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$       ثابت پلانک:  $6.63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$       سرعت نور:  $3 \times 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$

۱.  $2/5$       ۲.  $4/4$       ۳.  $7/6$       ۴.  $10/1$

۲۰- الکترونی در حلقه دایره ای به شعاع  $1/1$  آنگستروم در حال حرکت است. بر اساس مدل چرخنده صلب انرژی اولین حالت برانگیخته چرخشی آن چیست؟ (بر حسب ژول)

جرم الکترون:  $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$       ثابت پلانک:  $6.63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

۱.  $5.05 \times 10^{-19}$       ۲.  $9.50 \times 10^{-19}$       ۳.  $3.20 \times 10^{-16}$       ۴.  $8.00 \times 10^{-17}$

۲۱- ثابت نیرو در مولکول HCl برابر  $516 \text{ Nm}^{-1}$  است. انرژی پتانسیل ارتعاشی این مولکول وقتی در اثر ارتعاش پیوند آن به میزان  $0/11$  آنگستروم از حالت تعادل منحرف میشود چیست؟ (بر حسب ژول)

۱.  $3.10 \times 10^{-20}$       ۲.  $6.02 \times 10^{-20}$       ۳.  $1.50 \times 10^{-20}$       ۴.  $4.2 \times 10^{-20}$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

۲۲- طول موج کمترین انرژی انتقال در سری براکت برای طیف الکترونی  $L_i^{+2}$  بر حسب نانو متر کدام مورد زیر است؟

راهنمایی: انرژی اتم هیدروژن ( $E_H$ ) برابر با  $-21.7 \times 10^{-19} \text{ J}$  و عدد اتمی لیتیوم برابر با ۳ است.

ثابت پلانک:  $6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$  سرعت نور:  $6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$

- ۴۵۲ .۱      ۴۰۵۰ .۲      ۹۱/۱ .۳      ۳۰/۳ .۴

۲۳- برای ذره در جعبه دو بعدی با طول  $a=2b$  انرژی نقطه صفر کدام است؟

- ۵ $h^2 / 8ma^2$  .۱      ۵ $h^2 / 8mb^2$  .۲       $h^2 / ma^2$  .۳       $13h^2 / 8ma^2$  .۴

۲۴- برای ذره در جعبه سه بعدی کدام تابع زیر تابع ویژه سیستم است؟

- $\Psi_{511} + \Psi_{333}$  .۱       $\Psi_{221} + \Psi_{333}$  .۲       $\Psi_{511} + \Psi_{421}$  .۳       $\Psi_{511} + \Psi_{143}$  .۴

۲۵- برای چرخنده صلب در صفحه با انرژی  $9h^2 / 8\pi^2 I$  مقدار اندازه گیری شده برای گشتاور زاویه ای کدام است؟

- $3\hbar$  .۱       $\sqrt{12}\hbar$  .۲       $3\hbar$  یا  $-3\hbar$  .۳      صفر .۴

۲۶- برای چرخنده صلب در صفحه توابع موج:

۱. تابع ویژه اپراتور  $d/d\phi$  هستند.

۲. همگی درجه همترازی ۲ هستند.

۳. متناظر با انرژی هستند که با مربع عدد کوانتومی افزایش می یابد.

۴. شرط تک مقدار بودن آن بر اساس شرایط مرزی است.

۲۷- برای نوسانگر هماهنگ در حالت  $v=1$  با تابع موج  $\left(\frac{4\alpha}{\pi}\right)^{1/4} x e^{-\frac{x^2}{2}}$  مکانهایی که در آن دانسیته احتمال ماکزیمم است عبارتند از:

- $x=1$  .۱       $x=-1$  .۲       $x=0$  .۳       $x=\pm 1$  .۴

۲۸- برای نوسانگر هماهنگ یک بعدی در حالت  $n=5$  متوسط انرژی پتانسیل کدام است؟ راهنمایی: برای نوسانگر هماهنگ کلاسیکی متوسط انرژی پتانسیل با متوسط انرژی جنبشی برابر است.

- $\frac{11}{4} hv$  .۱       $\frac{11}{2} hv$  .۲       $\frac{11}{8} hv$  .۳       $\frac{5}{4} hv$  .۴

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (کاربردی) (۱۱۱۴۰۲۷)

۲۹- برای مولکول  $H^{19}F$  جذب مادون قرمز برای انتقال  $n=0$  به  $n=1$  طول موج طیفی  $4139 \text{ cm}^{-1}$  مشاهده می شود. ثابت نیرو برای این مولکول چیست؟ (در سیستم متریک)

سرعت نور:  $3 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$  جرم اتم هیدروژن:  $1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$

۱. ۵۱۲ .۰۲ ۲. ۹۶۵ .۰۳ ۳. ۴۰۸ .۰۴ ۴. ۳۱۱ .۰۴

۳۰- برای مولکول  $H^{81}Br$  هرگاه ثابت نیرو (K) برابر  $363$  نیوتن بر متر باشد، عدد موج اصلی ارتعاشی بر حسب  $\text{cm}^{-1}$  کدام است؟

جرم اتم هیدروژن:  $1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$  سرعت نور:  $3 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$

۱. ۲۳۰۸ .۰۲ ۲. ۲۹۹۱ .۰۳ ۳. ۲۴۹۰ .۰۴ ۴. ۴۱۳۸ .۰۴

۳۱- برای اتم هیدروژن تابع ویژه در سیستم اتمی بصورت زیر تعریف شده است:

در اینصورت حالت اتم هیدروژن چیست؟  $\Psi = N(6r - r^2) \exp(-r/3) \sin \theta \sin \phi$

۱. s .۰۲ ۲.  $p_x$  .۰۳ ۳.  $p_y$  .۰۴ ۴.  $p_z$  .۰۴

۳۲- کدام جمله درست است؟

۱. ترکیب خطی از توابع  $\Psi_{3s}$  و  $\Psi_{4s}$  تابع ویژه هامیلتونی اتم هیدروژن است

۲. ترکیب خطی از توابع  $\Psi_{2s}$  و  $\Psi_{2p0}$  تابع ویژه هامیلتونی اتم هیدروژن است

۳. ترکیب خطی از توابع  $\Psi_{123}$  و  $\Psi_{222}$  تابع ویژه هامیلتونی ذره در جعبه مکعبی است

۴. ترکیب خطی از توابع  $\exp(2i\phi)$  و  $\exp(-3i\phi)$  تابع ویژه هامیلتونی چرخنده صلب دو بعدی است.

۳۳- حاصل انتگرال  $\int \Psi_{2px} \hat{L}_z \Psi_{2px} dv$  چیست؟

۱. صفر .۰۲ ۲.  $\hbar$  .۰۳ ۳.  $-\hbar$  .۰۴ ۴.  $\sqrt{2}\hbar$  .۰۴

۳۴- فاکتور نرمال کننده تابع  $r \exp(-r) \cos \theta$  چیست؟ راهنمایی:  $\int_0^\infty r^n e^{-qr} = \frac{n!}{q^{n+1}}$  و  $\int \sin \theta \cos^p \theta = -\frac{1}{p} \cos^p \theta$

۱.  $\frac{1}{\pi}$  .۰۲ ۲.  $\frac{1}{\sqrt{\pi}}$  .۰۳ ۳.  $\sqrt{\pi}$  .۰۴ ۴.  $\frac{1}{\pi^2}$  .۰۴

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (کاربردی) (۱۱۱۴۰۲۷)

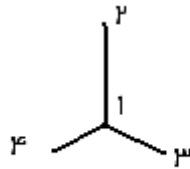
۳۵- برای حالت پایه اتم هیدروژن متوسط انرژی پتانسیل کدام است؟ (بر حسب الکترون ولت)

۱.  $-۱۳/۶$       ۲.  $-۲۷/۲$       ۳.  $-۶/۸$       ۴.  $۱۳/۶$

۳۶- هر گاه  $\int_0^{\infty} x \exp(-x^2) dx = 1/2$  باشد در این صورت حاصل انتگرال  $\int_{-\infty}^{\infty} x \exp(-x^2) dx$  کدام است؟

۱. ۱      ۲.  $۰/۲۵$       ۳. ۰      ۴. ۲

۳۷- برای سیستم آلایل متیل مزدوج زیر بر اساس مدل هوکل دترمینان هوکل کدام است؟  $(\alpha - E)/\beta = x$



$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 \\ 1 & x & 0 & 0 \\ 1 & 0 & x & 0 \\ 1 & 1 & 1 & x \end{vmatrix}$ .۴	$\begin{vmatrix} x & 1 & 1 & 1 \\ 1 & x & 0 & 0 \\ 1 & 0 & x & 1 \\ 1 & 1 & 0 & x \end{vmatrix}$ .۳	$\begin{vmatrix} x & 1 & 1 & 1 \\ 1 & x & 0 & 0 \\ 1 & 0 & x & 0 \\ 1 & 0 & 0 & x \end{vmatrix}$ .۲	$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 1 \\ 1 & x & 1 & 1 \\ 1 & 0 & x & 0 \\ 1 & 0 & 0 & x \end{vmatrix}$ .۱
---	---	---	---

۳۸- کدام جمله در مورد نوسانگر هماهنگ از دیدگاه مکانیک کوانتومی صادق است؟

- در پائین ترین حالت انرژی این ذره بیشتر اوقات خود را در نزدیک به نقاط برگشت کلاسیکی میگذراند.
- در نقاط برگشت کلاسیکی  $\psi = 0$  است
- ترازهای انرژی دارای درجه تبهگنی ۱ هستند
- تمام موارد صحیح است

۳۹- برای ذره در جعبه سه بعدی با طول  $a=b=c/2$  انرژی در حالت  $n_x=1, n_y=2, n_z=2$  کدام است؟

۱.  $3h^2 / 4mc^2$       ۲.  $3h^2 / 4ma^2$       ۳.  $3h^2 / 8ma^2$       ۴.  $5h^2 / 8ma^2$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

۴۰- برای سیستم (۱ و ۳- بوتادی) ان کدام جمله درست است؟

۱. نمودار تراز انرژی مربوط به الکترونهاي پای آن بر اساس مدل هوکل دارای سه تراز است
۲. نمودار تراز انرژی مربوط به الکترونهاي پای آن بر اساس مدل هوکل هیچگونه تبهگنی ندارد.
۳. انرژی عدم استقرار آن  $-0.472\beta$  است.
۴. اگر الکترونهاي پای آن در دو پیوند اتیلنی توزیع شوند انرژی کل برابر  $2\alpha + 4\beta$  است.